

Оптимизация процедуры решения динамических уравнений дискретной безызлучательной модели разреженной плазмы.

Л. В. Бородачев,* С. С. Анненков†

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра математики. Россия,
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

(Статья поступила 23.09.2019; Подписана в печать 24.09.2019)

На основе сопряжения динамических схем предложен подход к оптимизации процедуры решения уравнений движения частиц самосогласованной модели разреженной плазмы. Методика апробирована в рамках дискретного дарвинского алгоритма на модельной задаче о вайбелевской неустойчивости.

PACS: 52.65

УДК: 519.6:533.9.

Ключевые слова: модель Власова–Дарвина, PIC–алгоритм, динамические схемы, неустойчивость Вайбеля.

ВВЕДЕНИЕ

Ретроспектива работ, посвященных численным исследованиям по методу макрочастиц в области низкочастотной плазмифизики [1], говорит об устойчивом интересе к использованию в полевой части самосогласованной модели плазмы приближения Дарвина [2]. Оно подразумевает пренебрежение поперечным током смещения, что исключает наличие свободных электромагнитных полей и позволяет рассматривать систему как незапаздывающую. Очевидным следствием этого в контексте конечно-разностного формализма является снятие ограничений на шаг по времени при явных схемах численного решения полевых уравнений, обусловленных критерием Куранта [3]. Таким образом, экономичность дарвинских алгоритмов напрямую зависит от выбора шага разностного интегрирования уравнения движения частиц, обусловленного как физическими соображениями, так и условиями устойчивости.

В связи с этим возникает возможность численно минимизировать расчет, сопрягая разные динамические схемы в рамках одной программы, реализующей численный эксперимент. В частности, методика, предложенная в данной работе, подразумевает переключение между явной и неявной схемами, диктуемое величиной временного шага, наиболее подходящего для моделирования конкретной стадии исследуемого процесса.

Отметим, что для указанной выше области математического моделирования, которой свойственны продолжительные по времени компьютерные эксперименты, использование такой возможности особенно актуально.

*E-mail: borodach2000@mail.ru

†E-mail: annenkov97@gmail.com

1. ДИСКРЕТНАЯ МОДЕЛЬ ВЛАСОВА–ДАРВИНА

В случае разреженной сильно ионизованной плазмы плазменные колебания, поддерживаемые внутренними электромагнитными полями, имеют частоты много больше частоты парных столкновений и пространственные размеры много меньше длины свободного пробега частиц, что позволяет для широкого круга явлений плазмифизики полностью пренебречь столкновительными эффектами, играющими роль малых возмущений на фоне коллективных взаимодействий. Динамика частиц при этом обуславливается электромагнитным полем, которое, в свою очередь, порождается неоднородными плотностями заряда и тока. Подобный подход, учитывающий взаимное и согласованное влияние полей и частиц бесстолкновительной плазмы, впервые был предложен А. А. Власовым [4]. Математически он представляется системой, в общем случае включающей однородные кинетические уравнения Больцмана для одночастичных функций распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ каждого сорта (α) частиц (с массой m_α и зарядом q_α) и уравнения Максвелла для внутреннего электромагнитного (\mathbf{E}, \mathbf{B}) поля:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} (\mathbf{E} + \frac{1}{c} (\mathbf{v} \times \mathbf{B})) \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{v}} = 0,$$

$$\begin{cases} \nabla \mathbf{E} = 4\pi \rho, \\ \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \nabla \mathbf{B} = 0. \end{cases} \quad (1)$$

Плотности заряда и тока могут быть представлены следующим образом:

$$\rho = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int f_{\alpha} d\mathbf{v}, \quad \mathbf{j} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int \mathbf{v} f_{\alpha} d\mathbf{v}.$$

В вычислительном аспекте формализм интересен двумя характерными моментами.

Динамическая и полевая части равноправны, и, следовательно, уравнения поля могут быть представлены в интересующем нас далее безызлучательном или дарвинском приближении [2], адекватно описывающем процессы в интересующей нас области физики плазмы. Модель принципиально нелинейна, что обусловлено непосредственной текущей взаимосвязью фазового распределения частиц и внутренних электромагнитных полей. Последнее требует активного использования в ее практическом приложении численного анализа, в частности, по методу макрочастиц (ММ) как наиболее эффективного в дискретной аппроксимации кинетического представления разреженной плазмы.

Копцепция метода крупных частиц предполагает, что эволюция начального состояния любой заданной в области D через $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ совокупности реальных заряженных частиц $\int_{-\infty}^{\infty} \int_D f d\mathbf{r} d\mathbf{v} \gg 1$ достаточно хорошо описывается с помощью фазовых траекторий малого ансамбля макрозарядов, движущихся в порождаемых ими самосогласованных электромагнитных полях. Под макрочастицей (МЧ) понимают пакет, которому приписывается масса, заряд и средняя скорость включенных в неё реальных частиц. При этом гладкая одночастичная функция распределения замещается дискретной $f^D(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ для конечного ($j = 1, 2, \dots, N$) числа модельных (крупных) частиц, траектории которых аппроксимируют характеристики уравнения Власова.

$$\frac{d\mathbf{r}_j}{dt} = \mathbf{v}_j; \quad \frac{d\mathbf{v}_j}{dt} = \frac{q_j}{m_j} (\mathbf{E}_j + \frac{1}{c} [\mathbf{v}_j \times \mathbf{B}_j]), \quad j = \overline{1, N} \quad (4)$$

Очевидно, что степень адекватности такого описания определяется количеством присутствующих в системе модельных частиц. Отметим, что в современной практике число используемых макрочастиц N достигает величин порядка 10^8 , так что львиную долю численных затрат в компьютерных экспериментах по ММ составляет именно расчет динамических траекторий. Таким образом любая оптимизация процедуры решения уравнений движения частиц даст существенную экономию вычислительных ресурсов. Последнее особенно актуально для реализации дискретных плазменных алгоритмов в виде PIC-кодов [5] на малых платформах, в частности массовых персональных компьютерах.

С математической точки зрения, суть дарвинского приближения состоит в как можно более точном представлении электромагнитного поля в системе с мгновенным дальнедействием зарядов.

Используя теорему Гельмгольца о разложении произвольного векторного поля $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ на потенциальную и вихревую составляющие [6], можно получить уравнения дарвинского формализма в следующем виде [7]:

$$\begin{cases} \nabla \mathbf{E}_l = 4\pi\rho, & \nabla \mathbf{E}_t = 0 \\ \nabla \times \mathbf{E}_l = 0, & \nabla \times \mathbf{E}_t = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}_l}{\partial t}, \\ \nabla \mathbf{B} = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Как легко видеть, единственное отличие дарвинского описания полей от максвелловского – отсутствие поперечной составляющей тока смещения. Однако, оставшаяся продольная компонента обеспечивает выполнение уравнения непрерывности заряда вдоль направления распространения возмущений плотности частиц.

Отметим характерные черты приближения в контексте настоящей работы.

Прежде всего, дарвинская аппроксимация не описывают свободную электромагнитную волну (излучение), что объясняет терминологию «безызлучательная». При этом, сохраняя индукционные эффекты, она допускает значительное сокращение вычислительных затрат за счет более дешевых гибридных описаний плазмы (например, рассматривать ионы в виде положительного фона, оставляя электроны «электромагнитными» [8]).

Далее, расщепление полей и токов на продольные и поперечные части позволяет в рамках дарвинской модели реализовывать дробномерные (фазово не симметричные) постановки. Очевидное следствие этого в экспериментах по ММ — существенное уменьшение числа макрочастиц (при сохранении эффективной дебаевской плотности) за счет сокращения размерности конфигурационного пространства.

2. МЕТОДИКА ОПТИМИЗАЦИИ СЧЕТА

Характерной чертой дискретной (по ММ) полной электромагнитной модели является наличие «быстрого» (со скоростью света C в полевой части) и «медленного» (с тепловой скоростью $v_T \ll C$ в динамической части) движений. При этом условие устойчивости явного (наиболее экономичного) численного решения модели [3]:

$$v_{\text{сет}} = h/\tau > v_{\text{фаз}}, \quad \text{где} \\ v_{\text{фаз}} = v_T \text{ (медленное движение)}, \\ C \text{ (быстрое движение)}.$$

И общий шаг эволюции выбирается по более жесткому условию устойчивости:

$$\tau = \tau_f (v_{\text{фаз}} = C).$$

Таким образом в классической постановке временной шаг решения динамических уравнений τ_p существенно занижен и явная численная модель Власова–Максвелла крайне неэкономична для исследований низкочастотных процессов плазмы (по характеру, как правило, долговременных и крупномасштабных).

Для указанного круга задач весьма эффективной оказывается дискретная самосогласованная дарвинская модель, поскольку полностью снимает условие Куранта $\tau < h/c$ в силу «незапаздывающего» характера. Теперь величина временного шага эволюции $\tau = \tau_p$ определена именно процедурой разностного интегрирования уравнений движения частиц, выбор которой обусловлен как физическими соображениями, так и условиями ее устойчивости.

В этой связи представляет интерес использование не одной, а нескольких динамических схем в рамках одного дискретного плазменного алгоритма, позволяющее детальное временное разрешение моделируемого процесса на «активных» стадиях и крупные шаги интегрирования в периодах стагнации, что существенно минимизирует вычислительные затраты.

Общий подход состоит в мониторинге резкого характера изменений величины базового параметра (параметров) моделируемого процесса как критерий перехода на другую, более экономичную и физически адекватную схему. При этом вопрос о его выборе должен решаться в каждой конкретной постановке компьютерного эксперимента отдельно. Вместе с тем, учитывая характер исследуемых процессов на базе модели Власова–Дарвина, в основе которых лежат различного вида кинетические неустойчивости, легко понять, что роль такого параметра может с успехом играть плотность энергии того или иного вида или амплитуда характерной моды процесса, рост которой, как правило, соотносится с теоретическими оценками инкремента. Справедливость этого положения будет показана ниже, при решении демонстрационной задачи.

2.1. Мультисхемный алгоритм

Как уже указывалось предлагаемая методика оптимизации заключается в рациональном текущем сопря-

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{v}^{1(\nu+1)} - \mathbf{v}^0}{\tau} = \frac{q}{2m} \left\{ (\mathbf{E}^0 + \mathbf{E}^{1\nu}) + \frac{1}{c} [(\mathbf{v}^0 \times \mathbf{B}^0) + (\mathbf{v}^{1\nu} \times \mathbf{B}^{1\nu})] \right\}, \\ \frac{\mathbf{r}^{1(\nu+1)} - \mathbf{r}^0}{\tau} = \frac{\mathbf{v}^0 + \mathbf{v}^{1(\nu+1)}}{2}. \end{array} \right.$$

Схема безусловно устойчива, что снимает формальное ограничение на временной шаг, но имеет более высокую вычислительную стоимость, связанную с необходимостью итерационной процедуры решения с заданной точностью, как правило, определяемой в сеточной норме L_2 .

Отдельно коснемся вопросов сопряжения базовых схем, обусловленных процедурой их динамического переключения в процессе текущего счета. Особенность схемы «Leap-frog» заключается в центрировании по времени за счет нахождения координат на целых слоях по времени, а скоростей — на полуцелых; неявная же редуцированная схема подразумевает нахождение фазовых координат на целых слоях. Это приводит к необходимости «сшивания» скоростей при переключении с одной схемы на другую, которое выглядит сле-

жении явной (экономичной, но условно устойчивой) и неявной (безусловно устойчивой, но менее экономичной) схем, обусловленном величиной временного шага τ , физически адекватного конкретной стадии исследуемого процесса.

В качестве базовых динамических схем ниже использовались: явная и неявная схемы 2-ого порядка точности. Приведем их вид в терминах послыонного перехода $t^1 = t^0 + \tau$.

Явная схема с перешагиванием (Leap-Frog) [8]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{v}^{1/2} - \mathbf{v}^{-1/2}}{\tau} = \frac{q}{m} \left\{ \mathbf{E}^0 + \frac{1}{c} \frac{\mathbf{v}^{1/2} + \mathbf{v}^{-1/2}}{2} \times \mathbf{B}^0 \right\}, \\ \frac{\mathbf{r}^1 - \mathbf{r}^0}{\tau} = \mathbf{v}^{1/2}. \end{array} \right.$$

Симметрия схемы обеспечивает требуемый порядок точности, а явный характер обуславливает экономичность и простоту реализации. Существенным недостатком является ограничение шага по времени, связанное с условием устойчивости $\tau\omega_{pe} < 2$.

Неявная редуцированная схема [9]:

дующим образом:

$$\mathbf{v}^{1/2} = \frac{1}{2}(\mathbf{v}^0 + \mathbf{v}^1), \quad \mathbf{v}^0 = \frac{1}{2}(\mathbf{v}^{1/2} + \mathbf{v}^{-1/2}).$$

2.2. Практическая реализация методики

Для апробации указанной методики оптимизации был выбран программный код, реализующий дискретную модель Власова–Дарвина в модифицированном гамильтоновом представлении с геометрией фазового пространства (x, V_x, V_y, V_z) и периодическими граничными условиями [10]. В виде базовых схем динамического блока использовались указанные выше «Leap-frog» и «Неявная редуцированная».

В качестве модельной задачи была выбрана электромагнитная неустойчивость по Вайбелю [11], для чис-

ленного исследования которой ранее успешно применялись безызлучательные (дарвинские) коды (см., например, работы [12],[13]).

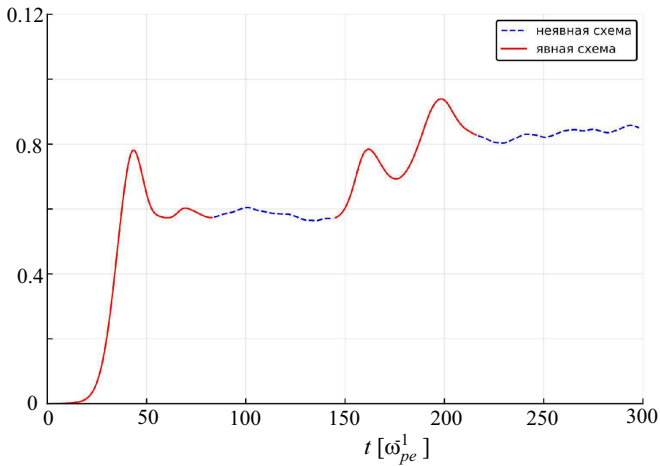


Рис. 1: Временной профиль средней плотности энергии магнитного поля в единицах начальной кинетической энергии частиц

Вайбелевскую неустойчивость (ВН) вызывает анизотропия функции распределения частиц по скоростям. Возникающие при этом токовые слои сфазированы та-

ким образом, чтобы усилить спонтанно возникшее в начале распределение магнитного поля, способствуя росту возмущений, имеющему линейную и нелинейную стадии с последующим этапом стагнации (рис. 1).

В контексте методического обоснования были взяты параметры постановки классических численных исследований однокомпонентной вайбелевской неустойчивости [12]: $T = 300$, $\tau = 0.1$, $h = 0.3$, $N_x = 50$, $N_e = 2.5 \times 10^4$, $u_z = 0.25c$, $A = 24$, — где соответственно указаны время моделирования, шаг по времени (для явной схемы), размер ячейки, количество узлов сетки, количество электронов, их тепловая скорость вдоль оси z , показатель анизотропии ($A \equiv \frac{u_z^2}{u_x^2} - 1$) (ионы представлены стационарным равномерным положительным фоном).

Рассмотрим основной вопрос практической реализации методики - как формализовать переход с одной схемы на другую в процессе счета. Для ответа получим критерий указанного перехода в рамках настоящей задачи.

Ключевым параметром, на который следует опираться в выборе динамической схемы при моделировании ВН, является средняя плотность энергии магнитного поля, что определяет следующий критерий:

$$\begin{cases} |w_B(t + \tau) - w_B(t)|/w_B(t) < \delta w, & \text{— неявная схема с увеличенным шагом,} \\ |w_B(t + \tau) - w_B(t)|/w_B(t) > \delta w, & \text{— явная схема с базовым шагом,} \end{cases}$$

где $\delta w = |\exp(2\hat{\gamma}\tau) - 1| \simeq 2\hat{\gamma}\tau$, $\tau = \tau_{ex}$ или $\tau = \tau_{im}$ в зависимости от того, явная или неявная схема соответственно использовалась на данном шаге. Величина $\hat{\gamma}$ выбиралась порядка 1-3% от максимальной величины инкремента ВН γ_{max} , которая легко усматривается из анализа работ [12, 13]).

Текущая очередность использования динамических схем графически отображена на рис. 1 (см. сплошные и пунктирные отрезки кривой).

Отметим, что прирост скорости вычислений имеет место только при соотношении временных шагов τ_{im}/τ_{ex} , превышающем соотношение временных затрат, приходящихся на выполнение одной итерации цикла моделирования (с учетом нахождения текущих значений внутренних полей):

$$\tau_{im}/\tau_{ex} > t_{im}^{cч}/t_{ex}^{cч} = k_{mod},$$

где $t_{ex}^{cч}$ и $t_{im}^{cч}$ — время счета (например, в секундах), приходящееся на один шаг симуляции при использовании явной и неявной схемы соответственно.

Величина k_{mod} зависит от вычислительной мощности конкретного оборудования и должна быть или за-

ранее известна, или получена из методического обеспечения компьютерного эксперимента. В частности, на персональном компьютере средней мощности (с процессором Intel Core i7-2670QM) авторы определили $k_{mod} \simeq 5.3$.

Подводя краткий итог практической апробации методики, отметим, что организация переключений схем, вообще говоря, может иметь и более сложную структуру. Однако даже при таком, достаточно простом варианте чередования базовых схем динамического блока совокупное сокращение времени симуляции (по сравнению со «сплошным проходом» явной схемой с малым шагом) для использованных значений $\tau_{ex} = 0.1$, $\tau_{im} = 1.0$ составило $\sim 50\%$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен общий подход к оптимизации счета на базе дискретных дарвинских кодов, основанный на мультисхемной организации динамического блока, предполагающей сопряжение явных и неявных схем

второго порядка точности.

Апробация данной методики в компьютерных экспериментах по вайбелевской неустойчивости дало существенное сокращение времени симуляции (в сравнении с традиционным счетом по явной схеме).

Использованный подход применим к широкому спектру задач моделирования низкочастотной плазмифизики с ожидаемым сокращения общего времени симуляции (для традиционных вычислительных платформ) минимум на треть.

Развитие методики предусматривает совершенствование как критериев, так и самой процедуры перехода, что предполагает более сложную динамику текущих сопряжений базовых схем и дальнейшую минимизацию счетного времени.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 16-01-00690 А).

-
- [1] Арцимович Л. А., Сагдеев Р. З. Физика плазмы для физиков. М.: Атомиздат, 1979.
- [2] Darwin C. G. // *Phil. Mag.* 1920. **39**. P. 537.
- [3] Hockney R. W., Eastwood J. W. // *Computer Simulation Using Particles*. N.-Y.: McGraw-Hill, 1981.
- [4] Власов А. А. Теория многих частиц. М.-Л.: ГИТТЛ, 1950.
- [5] Григорьев Ю. Н., Вишивков В. А. Численные методы «частицы в ячейках». Новосибирск: Наука, Сиб. изд. РАН, 2000.
- [6] Корн Г., Корн Н. // *Справочник по математике*. М.: Наука, 1974.
- [7] Бородачев Л. В. // *Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон.* 2006. № 1. С. 7.
- [8] Бэдсел Ч., Ленгдон А. Физика плазмы и численное моделирование. / Пер. с англ. М.: Энергоатомиздат. 1989.
- [9] Бородачев Л. В. // *ЖВМиМФ*. 1991. **31**, №6. С. 934.
- [10] Бородачев Л. В., Беляев А. А. // *Ученые записки физ. ф-та Моск. ун-та*. 2017. № 4. 1740702.
- [11] Чен Ф. Введение в физику плазмы. М.: Мир, 1987.
- [12] Morse R. L., Nielson C. W. // *Phys. Fluids*. 1971. **14**. P. 830.
- [13] Borodachev L. V., Kolomiets D. O. // *Plasma. J. Plasma Phys.* 2011. **77**. P. 277.

Modified Hamiltonian algorithm for discrete reduced Vlasov–Darwin model.

L. V. Borodachev^a, S. S. Annenkov^b

*Department of Mathematics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
Moscow 119991, Russia*

E-mail: ^aborodach2000@mail.ru, ^baa.beljaev@physics.msu.ru

Based on the conjugation of dynamic schemes, an approach is proposed for optimizing the procedure for solving the equations of motion of particles in a self-consistent model of a rarefied plasma. The technique was tested in the framework of the discrete Darwin algorithm on the problem of modeling Waibel instability.

PACS: 52.65.

Keywords: Vlasov-Darwin model, PIC-method, numerical algorithm, magnetoactive plasma.

Received 23 September 2019.

Сведения об авторах

1. Бородачев Леонид Васильевич — доктор физ.-мат. наук, доцент; e-mail: borodach2000@mail.ru.
2. Анненков Сергей Сергеевич — бакалавр; e-mail: annenkov97@gmail.com.